



TITLE:

エネルギー機能材料の電子構造と光物性

AUTHOR(S):

蜂谷, 寛

CITATION:

蜂谷, 寛. エネルギー機能材料の電子構造と光物性. 京都大学化学研究所
スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2017, 2016: 50-50

ISSUE DATE:

2017-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/227982>

RIGHT:

エネルギー機能材料の電子構造と光物性

Electronic states and optical properties of the functional energy materials

京都大学 大学院エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

量子エネルギープロセス分野 蜂谷 寛

研究成果概要

熔融 CsCl-AlCl₃ 二元系に着目して第一原理分子動力学法 ADMP (Atom-centered Density Matrix Propagation) によるイオン拡散のダイナミクスを検討した。

本年度は、さらにユニットセルのサイズを 2 倍に拡大してイオン数を倍増した (8×CsAlCl₄) 計算を行った。

GAUSSIAN09 を使い、汎関数 HSE06 (HSEh1PBE), 基底関数として Modified def2-SVP を使い、0.2 fs の time step で 700 K での構成イオンの軌道を、現在までのところ 0.7 ps にわたり計算している。初期原子配置には CsAlCl₄ 結晶の XRD によって求められた構造を用いた。

AlCl-AlCl₃ (A: alkaline metals) の形の熔融塩において、1:1 の組成付近での Al(III) イオンのとる錯体構造は長らく議論的となっているが (M. P. Tosi, D. L. Price, M.-L. Saboungi, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44** 173 (1993)), A = Cs では、FIG. 1 に示すとおり、かねてから主張されている AlCl₄⁻ アニオン構造のみが存在するわけではなく、四面体 AlCl₄⁻ アニオン構造画帳点共有で連なった Al₂Cl₇⁻ 構造を含むことがわかった。1:1 組成を境として、前者の構造から後者へと急激に変化し、当該組成では両者が存在しうることが示唆される。

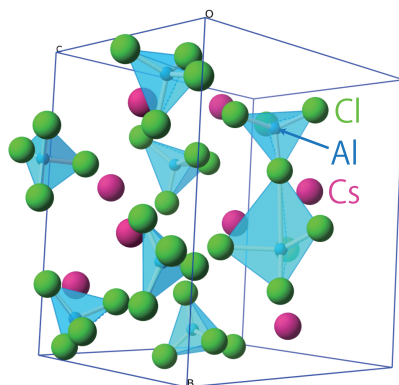


FIG. 1 Ionic configurations after 0.7 ps calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl₃ at 700 K.

発表論文(謝辞あり)

該当なし

発表論文(謝辞なし)

Yoshihide Sakanaka, Akira Murata, Takuya Goto, Kan Hachiya

“Electrodeposition of porous Si film from SiO₂ in molten BaCl₂-CaCl₂-NaCl”

Journal of Alloys and Compounds, volume 695, pp. 2131-2135 (2017).